Revista PLANTÔ

Volume 1 Número 3
Setembro/Dezembro de 2020

CC BY NC

INSTITUTO FEDERAL Brasília Campus Planaltina

NS5 RdRp: uma proteína associada à replicação como alvo promissor de antivirais para o Zika vírus

A febre Zika tornou-se uma grande preocupação na saúde pública mundial e do Brasil, principalmente depois da sua associação com casos de microcefalia. Não há vacinas nem medicamentos específicos para o vírus. Com a elucidação da estrutura da ZIKV NS5 RdRp, proteína associada à replicação viral, surgem possibilidades de tornar esta enzima um alvo de novos fármacos. Diante desta realidade, o objetivo deste estudo foi abordar algumas características estruturais da molécula NS5.

Henriqueta Monalisa Farias
henriquetamonalisa@gmail.com

Débora Souza dos Santos
debora.dbs13@gmail.com

Franklin Ferreira de Farias Nóbrega
nobrega.franklin13@gmail.com

Rafael Trindade Maia
rafael.rafatrin@gmail.com

Como a pesquisa foi desenvolvida?

A febre Zika é uma epidemia global transmitida principalmente por mosquitos, incluindo *Aedes aegypti* e *Aedes albopictus*, causada por um vírus da família Flaviviridae e de distribuição tropical. Estudos posteriores apontaram o mosquito *Culex quinquefasciatus* como vetor [1]. Como outros vírus da família Flaviviridae, o ZIKV é envelopado, tem formato icosaédrico e possui RNA como material genômico [2]. Apresenta nucleocapsídeo de 25-30 nm e na forma de vírion atinge 40 nm (Figura 1).

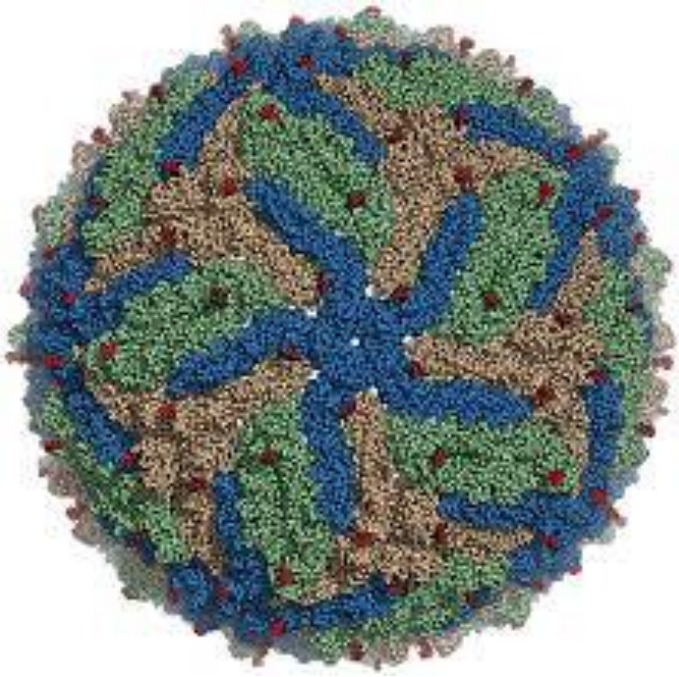

Figura 1. Estrutura do vírus Zika. Fonte: Google Imagens.

A análise filogenética indicou que para ZIKV existem duas cepas: uma africana que veio do leste da África entre o final do século 19 e o início do século 20 [3]; e uma linhagem asiática originada de migrações do vírus da África para o Sudeste Asiático, sendo relatada pela primeira vez neste continente na Malásia, e posteriormente dispersa para outros países [4].

Um trabalho recente solucionou a estrutura tridimensional da ZIKV NS5 através de cristalografia de raio X, com resolução de 1,9 angstroms (PDB-ID 5U04), e adotando uma forma semelhante à "mão

direita" com três domínios denominados "dedos" (Figura 2).

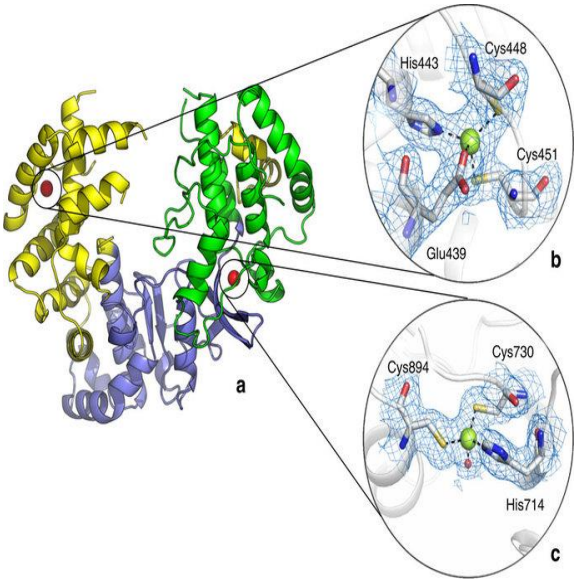

***Figura 2**. Visão geral do ZIKV NS5 RdRp; (A) domínios em verde ("polegar"), amarelo ("dedos") e azul ("palma"); (B) detalhe do domínio "dedos" mostrando resíduos de interação com o átomo de zinco; (C) detalhe do domínio "polegar" mostrando resíduos de interação com o átomo de zinco. Fonte: Godoy et al. (2017).*

Apesar de ter alta semelhança com estruturas homólogas de outros flavivírus, como do DENV e vírus da encefalite japonesa (JEV), ZIKV NS5 RdRp mostrou diferenças significativas no local de ligação, o que pode ser relevante para a seleção de um inibidor específico. Essas diferenças estruturais no sítio de ligação representam um alvo interessante para estudos visando à prospecção e desenvolvimento de novos fármacos.

A NS5 é uma proteína [5] flaviviral não estrutural associada à RNA polimerase (RdRp) e desempenha um papel fundamental na replicação do genoma viral. Considerando o fato dessa proteína estar ausente em hospedeiros mamíferos, torna a molécula uma forte candidata a alvos específicos de fármacos com ação antiviral. Os inibidores da polimerase têm obtido sucesso clínico no tratamento do vírus da hepatite C, mas dependem da ativação da quinase e causam problemas devido à sua toxicidade [5]. Estudos relataram a descoberta de novos inibidores de RdRp que demonstraram atividade contra o vírus da dengue, especificamente direcionados a uma região chamada *priming-loop*, que regula a ligação e polimerização do RNA [6].

O docking molecular, também conhecido como ancoragem molecular, é um experimento *in silico* (computacional) que visa simular a interação entre duas moléculas, gerando complexos proteína-ligante ou complexos proteína-proteína [7]. O reconhecimento molecular é baseado na complementaridade físico-química e nas características estruturais das moléculas em interação. As características estruturais, por sua vez, estão associadas a arranjos espaciais moleculares, dados por variações na orientação, posicionamento espacial e rotações de ligações químicas de moléculas em interação [7].

Resultados obtidos?

Nesse contexto, concluímos que o ZIKV NS5 RdRp apresenta muitas características de um fármaco alvo, e é possível pré-selecionar alguns compostos com alto potencial para serem utilizados como medicamento antiviral específico.

Referências consultadas

1-AYRES, C. F. J. Identification of Zika virus vectors and implications for control. *The Lancet Infectious Diseases*, Volume 16, Issue 3, 278 – 279. 2016.
2-SHAN, C. et al. An infectious cDNA clone of Zika virus to study viral virulence, mosquito transmission, and antiviral inhibitors. *Cell Host Microbe* 19, 891–900, 2016.
3-LANCIOTTI, R., et al. Phylogeny of Zika Virus in Western Hemisphere, 2015. *Emerging Infectious Diseases*, 22(5), 933-935, 2016.
4-ZANLUCA C. et al. First report of autochthonous transmission of Zika virus in Brazil. *Mem Inst Oswaldo Cruz*, 110:569–72, 2015.
5-GODOY, A. et al. Crystal structure of Zika virus NS5 RNA-dependent RNA polymerase. *Nature Communications*. VL - 8, 2017.
6-LIM, S. P. et al. Potent allosteric dengue virus NS5 polymerase inhibitors: mechanism of action and resistance profiling. *PLoS Pathogens* 12, 2016.
7-VERLI, H. Bioinformática - da Biologia à flexibilidade molecular. - 1. ed. – São Paulo: SBBq, 2014. 282 p.

Revista PLANTÔ

Volume 1 Número 3
Setembro/Dezembro de 2020

CC BY NC

INSTITUTO FEDERAL Brasília Campus Planaltina

Resíduo do setor sucroalcooleiro como opção de substrato na produção mudas de maracujazeiro doce

Em regiões no Brasil onde a produção de cana-de-açúcar tem consolidado sua matriz agroindustrial é comum observar no pátio das usinas uma grande quantidade de resíduo sólido (torta de filtro e cinza de caldeira). A torta de filtro é um resíduo abundante, e mesmo que já venha sendo utilizada nas lavouras de cana como adubo; sugere-se a utilização como ingrediente na composição de substratos para produção de mudas de hortaliças e fruteiras. Diante deste contexto, foram testadas diferentes quantidades de torta de filtro e cinza de caldeira na composição de substrato para produção de mudas de maracujazeiro doce por meio de estaquia semilenhosa.

Victor Hugo de Sousa
victorgtba.15@gmail.com

Uirá do Amaral
uira.amaral@ifb.edu.br

Riccely Ávila Garcia
riccelyavila@yahoo.com.br

Kássia A. Garcia Barbosa Ávila
kassiabarbosa@yahoo.com.br

Como a pesquisa foi desenvolvida?

O experimento foi conduzido em ambiente protegido na Faculdade de Filosofia e Ciências Humanas de Goiatuba, Goaituba-GO. As estacas foram obtidas a partir de plantas matrizes estabelecidas nas dependências da FAFICH.

O delineamento experimental utilizado foi em blocos casualizados com cinco tratamentos e quatro repetições, sendo que cada parcela foi composta por dezesseis estacas no total e quatro estacas úteis para avaliação. Os tratamentos testados estão dispostos na Tabela 1.

***Tabela 1**. Detalhamento dos tratamentos e as respectivas proporções das matérias-primas.*

Tratamentos*	Matéria-prima para composição do substrato			
	Torta de Filtro	Cinza de caldeira	Terra de barranco	Areia lavada
	---------- % ----------			
1	15	15	35	35
2	20	20	30	30
3	25	25	25	25
4	30	30	20	20
5	35	35	15	15

*S1: substrato 1; S2: Substrato 2; S3: substrato 3; S4: substrato 4 e S5: substrato 5.

Para formulação do substrato foi utilizado solo de barranco e areia lavada, sendo que a torta de filtro e a cinza de caldeira foram obtidas na Usina Bom Sucesso, no município de Goiatuba-GO.

As estacas foram obtidas a partir de ramos semilenhosos do último ciclo de crescimento, com aproximadamente 25 cm de comprimento. A coleta dos ramos foi realizada no período da manhã, no mesmo dia de confecção das estacas, sendo acondicionados em caixas plásticas contendo água. Após a coleta, as estacas foram submetidas ao

tratamento fitossanitário com hipoclorito de sódio a 0,5% por 10 minutos, e enxaguadas em água corrente durante 5 minutos. Em cada estaca foi mantida apenas uma folha com 50% de sua área total, tomando todo cuidado com a higienização da tesoura de poda em solução de álcool 70%.

As variáveis analisadas ao longo da condução do experimento foram:

1. Porcentagem de estacas com brotação (%) PEB – por meio de contagem visual foi estabelecida a quantidade de estacas que emitiram brotação. Este valor foi multiplicado por 100 e dividido pelo número de estacas utilizadas por parcela;

2. Porcentagem de mortalidade de estacas (%) PME - por meio de contagem visual foi estabelecida a quantidade de estacas que estiverem ressecadas e com coloração amarronzada. Este valor foi multiplicado por 100 e dividido pelo número de estacas utilizadas por parcela;

3. Comprimento de raízes (cm) CR – as raízes principais foram medidas com auxílio de régua milimetrada;

4. Comprimento da brotação (cm) CB – as brotações foram medidas com auxílio de régua milimetrada.

Após a obtenção dos dados foi realizada a análise de variância pelo teste F e havendo efeito significativo entre os tratamentos as médias foram comparadas pelo teste de média Tukey (5%) com auxílio do Programa Computacional SISVAR.

Resultados obtidos?

Conforme apresentado na Tabela 2, não houve diferença estatística entre os tratamentos para todas as variáveis analisadas. Tal fato, pode ser explicado pelo curto período de exposição das mudas aos respectivos tratamentos. A emissão de raízes no início da formação da rizosfera é um processo que não depende da composição química do substrato e está associado a reserva de carboidratos, nutrientes e hormônios da estaca. Portanto, é necessário que as mudas fiquem por um período superior a 120 dias para realização das análises.

O tratamento S1 (15% torta de filtro + 15% de cinza de caldeira + 35% terra de barranco + 35% areia lavada), apresenta as menores quantidades dos resíduos utilizados neste estudo. Considerando apenas os resultados obtidos nesta etapa da pesquisa, e levando em consideração a possível economia que o viveiricutor teria em sua utilização, este é o tratamento recomendado.

***Tabela 2**. Porcentagem de estacas brotadas (%) (PEB), porcentagem mortalidade de estacas (%) (PME), comprimento de raízes (cm) (CR), comprimento da brotação (cm) (CB). Faculdade de Filosofia e Ciências Humanas de Goiatuba – Goiás, 2017.*

Substratos[1]	Variáveis analisadas			
	PEB	PME	CR	CB
S1	97,00 a*	6,50 a	17,00 a	13,00 a
S2	84,50 a	8,00 a	25,75 a	17,00 a
S3	90,75 a	6,25 a	24,75 a	14,75 a
S4	83,00 a	9,50 a	20,25 a	14,75 a
S5	84,50 a	8,00 a	19,75 a	13,00 a
CV (%)	14,44	9,42	29,64	25,73

*[1]Subtratos - S1: 15% torta de filtro + 15% de cinza de caldeira + 35% terra de barranco + 35% areia lavada; S2: 20% torta de filtro + 20% de cinza de caldeira + 30% terra de barranco + 30% areia lavada; S3: 25% torta de filtro + 25% de cinza de caldeira + 25% terra de barranco + 25% areia lavada; S4: 30% torta de filtro + 30% de cinza de caldeira + 20% terra de barranco + 20% areia lavada; S5: 35% torta de filtro + 35% de cinza de caldeira + 15% terra de barranco + 15% areia lavada. *Médias seguidas com a mesma letra nas colunas, não diferem entre si pelo teste de Tukey, a 5% de probabilidade.*

Após concluir que os resíduos torta de filtro e cinza da caldeira não influenciaram as variáveis avaliadas como esperado, acrescenta-se ainda como sugestão para novos estudos, o aumento no tamanho do recebimento que no caso deste estudo foi de 25,0 x 14,5 cm (1472 cm^3) e a verificação da composição química dos resíduos por meio de análise laboratorial para melhor detalhamento da composição química.

Revista PLANTÔ

Volume 1 Número 3
Setembro/Dezembro de 2020

CC BY NC

INSTITUTO FEDERAL Brasília Campus Planaltina

Redes Neurais Artificiais na estimação da evapotranspiração de referência - ETo

A otimização dos recursos hídricos é um fator de desenvolvimento do processo agrícola. Na irrigação o dimensionamento do uso da água e o entendimento de variáveis de relevância na estimativa da Evapotranspiração de Referência - ETo contribuem no ajuste de modelos em regiões brasileiras. O estudo teve como objetivo modelar por meio de redes neurais artificiais perceptron multicamadas (RNA-MLP) a ETo, em função das variáveis climáticas do município de Ariquemes - RO.

Roberto Luís da Silva Carvalho
roberto.carvalho@ifb.edu.br

Angel Ramon Sanchez Delgado
asanchez@ufrrj.br

Como a pesquisa foi desenvolvida?

O método padrão FAO, que é reconhecido para a estimação, foi utilizado como referência para a modelagem por redes neurais.

Foram consideradas como variáveis de entrada no modelo as temperaturas (média, máxima e mínima diárias do ar), umidade e precipitação pluviométrica por serem de suma importância para construção do cálculo da evapotranspiração (CONCEIÇÃO e MARIN, 2004; ARAUJO et al., 2011; SOBRINHO et al., 2011).

Para a caracterização das séries temporais das temperaturas do ar (médias, máximas e mínimas), umidade do ar e precipitação pluviométrica foram utilizados os dados diários disponíveis no Instituto Nacional de Meteorologia – INMET, obtidos na estação Meteorológica Automática de Ariquemes/RO, no período de janeiro de 2011 a dezembro de 2013.

Os dados da evapotranspiração foram calculados seguindo o modelo Penman-Monteith- FAO (ALLEN et al., 1998) e publicados por Carvalho e Delgado (2016).

As redes neurais perceptrons de multicamadas (MLP) possuem estrutura com a camada de entrada, uma ou duas ocultas (nós computacionais) e uma camada de saída. O sistema de treinamento *error back-propagation* (HAYKIN, 2001) funciona com a aprendizagem em um passo à frente (propagação) e um passo atrás (retropropagação do erro ajustados de acordo com a regra de correção).

Foi utilizado o pacote "neuralnet" (FRITSCH e GUENTHER, 2016) do software R (R CORE TEAM, 2016) para ajuste dos modelos. Os neurônios são organizados em camadas, que são ligados pelas sinapses.

No caso do *neuralnet*, uma sinapse só pode se conectar a camadas posteriores. A camada de entrada é composta pelas variáveis independentes (X_i), com $i = 1, 2, 3 \ldots, k$, enquanto, a camada de saída é composta pela variável resposta (Y); por fim, as camadas intermediárias são denominadas de camadas ocultas (Co), ou variáveis latentes. As camadas de entrada e as camadas ocultas incluem um neurônio constante (intercepto - I_i), sendo este não influenciado por qualquer covariável.

Utilizou-se 70% da amostra para treinamento da rede e 30% para teste da rede neural.

Resultados obtidos?

As estatísticas descritivas das séries climáticas para o período de janeiro de 2011 a dezembro de 2013 estão apresentadas na Tabela 1 e não foram observados valores discrepantes para a localidade.

Tabela 1. Estatísticas descritivas das séries temporais climáticas do Município de Ariquemes (RO) no período de janeiro de 2011 a dezembro de 2013.

Séries Climáticas	Média	S	Mín.	Máx.
Precipitação (mm/dia)	6,27	14,16	0,00	120,80
Umidade Relativa do Ar (%)	80,63	8,69	39,79	94,33
Temperatura Média (°C)	25,64	1,25	17,86	29,08
Temperatura Máxima (ºC)	32,05	2,52	23,60	38,10
Temperatura Mínima (ºC)	21,79	1,76	13,10	24,50

O ajuste rede neural com as variáveis precipitação pluviométrica, umidade e temperaturas (máxima, mínima e média), foi iniciado com um modelo com 3 variáveis, seguido de 4 variáveis e, por fim, 5 variáveis. Os Erros Quadráticos Médios (EQM) observados foram de 0,22863, 0,21203 e 0,21192, respectivamente.

A Figura 1, apresenta a estrutura da Rede Neural MLP.

Para verificar a qualidade do ajuste do modelo foi realizada a comparação com os valores ajustados nos modelos RNA-MLP com os dados observados no mês de dezembro de 2013.

Observou-se correlação forte positiva entre as estimativas Penmam-Month-56 com as estimativas do modelo RNA (r = 0,878; p = 0,000). Da mesma forma, foram observados bons índices de concordância (d) com as estimativas RNA-MLP (d = 0,932). Resultando assim, em nível muito bom no coeficiente de concordância (c), segundo a escala proposta por Camargo e Sentelhas (1997), para a modelagem RNA-MLP (c = 0,818). De acordo com esses índices, observou-se que a modelagem obtive resultados similares quanto ao ajuste aos dados estimados pelo padrão FAO, no entanto, se configura um ganho visto que estes modelos foram ajustados com variáveis de mais simples obtenção, como temperatura, umidade e precipitação pluviométrica.

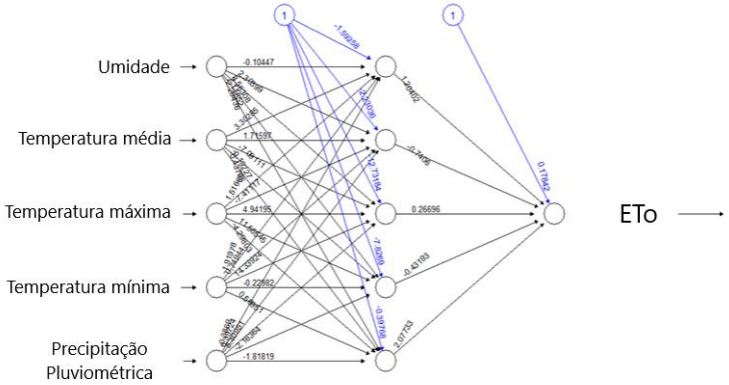

***Figura 1**. Estrutura da rede neural MLP para a ETo, com as variáveis umidade, precipitação, temperaturas máxima, média e mínima.*

No estudo realizado por Alves Sobrinho et al. (2011), os autores afirmaram como satisfatória a eficiência da modelagem por redes neurais artificiais (RNA) para estimar a evapotranspiração de referência (ETo) em função de dados diários de temperatura do ar. Nele foi utilizada uma RNA, do tipo *Feed-Forward Multilayer Perceptron*, treinada tomando-se por referência a ETo diária obtida pelo método de Penman-Monteith. No entanto, os resultados foram comparados com os métodos de estimação Blanney-Criddle-Hargreaves da ETo.

Por sua vez, Ferraz (2014) propôs uma RNA para estimar a ETo em função de dados climáticos e coordenadas geográfica no Estado do Rio Grande do Sul. Da mesma forma, utilizou-se o tipo *perceptron* de múltiplas camadas para estimação, obtendo-se índices ótimos de desempenho; neste caso, os autores ressaltaram a qualidade das estimativas, afirmando que as RNAs são ferramentas poderosas para estimação.

A utilização da modelagem RNA-MLP com variáveis de mais simples obtenção, entre elas a precipitação chuvosa, temperatura do ar e umidade foram satisfatórias para estimar a ETo. Tais modelos se configuraram como opções de ajustes para os dados climáticos; no entanto, futuros estudos são sugeridos em outras áreas do conhecimento.

Informações Adicionais (Opcional)

Os autores agradecem o apoio da Fundação de Apoio à Pesquisa de Rondônia (FAPERO).

Revista PLANTÔ

Volume 1 Número 3
Setembro/Dezembro de 2020
CC BY NC
INSTITUTO FEDERAL Brasília Campus Planaltina

Consórcio de cafeeiro e bananeiro em sistema agroflorestal de frutas nativas

Considerando os diferentes tipos de sistemas agrícolas em que o cafeeiro pode ser explorado, a agrofloresta tem sido uma opção para diversificação de espécies e geração de renda aos agricultores. Diante deste contexto, objetivou-se avaliar o crescimento do cafeeiro variedade "Catuaí Amarelo" consorciado com bananeira, sob diferentes densidades populacionais em agrofloresta com predominância de fruteiras nativas em fase inicial de crescimento.

Ademar Alves da Costa
ademarcosta084@gmail.com

Uirá do Amaral
uira.amaral@ifb.edu.br

Como a pesquisa foi desenvolvida?

O experimento foi desenvolvido no Instituto Federal de Ciência, Educação e Tecnologia de Brasília – Campus Planaltina. Entre as frutas nativas do Cerrado presentes na área é possível citar: cagaiteira (*Eugenia dysenterica*); baruzeiro (*Dipteryx alata*); jatobazeiro (*Hymenaea courbaril*); mangabeira (*Hancornia speciosa*); jenipapeiro (*Genipa americana*); araçazeiro (*Psidium cattleyanum*); mutambeira (*Guazuma ulmifolia*), etc.

Foram utilizadas mudas de cafeeiro da variedade "Catuaí Amarelo" (*Coffea arabica*), estas mudas foram transplantadas quando apresentavam três pares de folhas verdadeiras totalmente expandidas, coincidindo no dia 15 de novembro de 2019. Foi aberto um sulco de plantio utilizando subsolador na profundidade de 30 cm. Aplicou-se calcário dolomítico com PRNT 100% no interior do sulco na dose de 30 g por metro linear e acrescentado ainda um fertilizante fosfatado que contém macro e micronutrientes na dose de 50 g por metro linear. As bananeiras foram transplantadas em um berço com dimensão de 30 cm x 30 cm x 30 cm e acrescentada uma dose de 5 kg de esterco bovino curtido por berço.

Os cafeeiros foram dispostos de ambos os lados das mudas de bananeira. O espaçamento adotado foi de 1,00 m entre plantas em consórcio na linha com a cultura da bananeira variedade BRS Princesa (Figura 1).

Figura 1. Consórcio de cafeeiro e bananeira em sistema agroflorestal com prevalência de fruteiras nativas do Cerrado. Fonte: Amaral (2020).

O delineamento experimental utilizado foi em blocos inteiramente casualizados com quatro repetições e quatro tratamentos. Os tratamentos aplicados foram: café solteiro 5000 plantas ha^{-1}; 200

plantas ha^{-1} + bananeira; 400 plantas ha^{-1} + bananeira e 600 plantas ha^{-1} + bananeira.

As avaliações em campo iniciaram sessenta dias após a instalação do experimento e foram mantidas durante todo primeiro semestre de 2020, e finalizando as coletas dos dados quantitativos no mês de julho deste mesmo ano, sendo as variáveis analisadas:

- Altura de plantas (cm): esta variável foi obtida por meio da utilização de fita métrica, posicionando-a da base do caule até a última folha expandida;
- Diâmetro do caule: foi utilizado paquímetro manual e mediu-se a circunferência do caule 3 cm acima do solo;
- Número de folhas: foram consideradas folhas totalmente expandidas e a contagem foi realizada visualmente;
- Ramificações laterais: número de ramos plagiotrópicos, avaliadas por meio da contagem de todos os ramos laterais primários que apresentaram comprimento superior a 5 cm.

Os dados foram submetidos a correlação de Pearson e aplicou-se o método das variáveis canônicas biplot para visualizar a variabilidade geral do experimento e as tendências multivariadas. As análises foram realizadas no programa estatísticos R Core Team (2019).

Resultados obtidos?

Houve pegamento total das mudas em campo e as plantas de cafeeiro cresceram normalmente até os 180 dias após plantio (DAP), com paralização do crescimento nos 60 dias subsequentes em função das condições climáticas desfavoráveis.

As variáveis morfológicas que apresentaram maior correlação fenotípica foram: altura de plantas (ALT) e ramificações laterais (RL) (Figura 2).

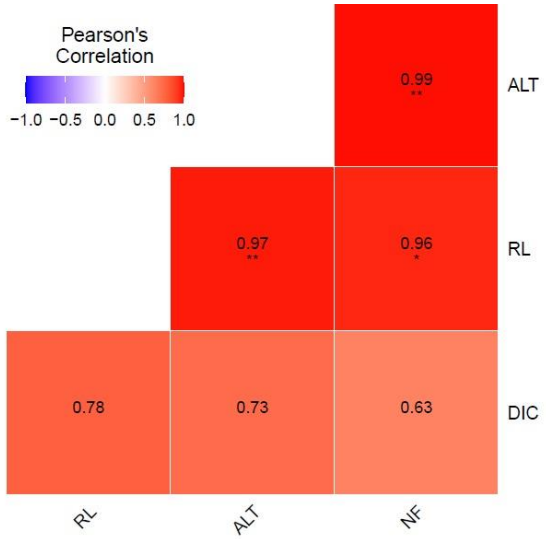

*Figura 2. Correlações fenotípicas aplicadas as variáveis morfológicas avaliadas, com significância pelo teste t. *significativo a 5% de probabilidade, **significativo a 1% de probabilidade, ***significativo a 0.1% de probabilidade.*

A figura 3 demonstra como as variáveis analisadas foram agrupadas durante o período de avaliação do experimento. Apenas a variável diâmetro do caule demonstrou aumento significativo durante o período de junho e julho (período seco e frio).

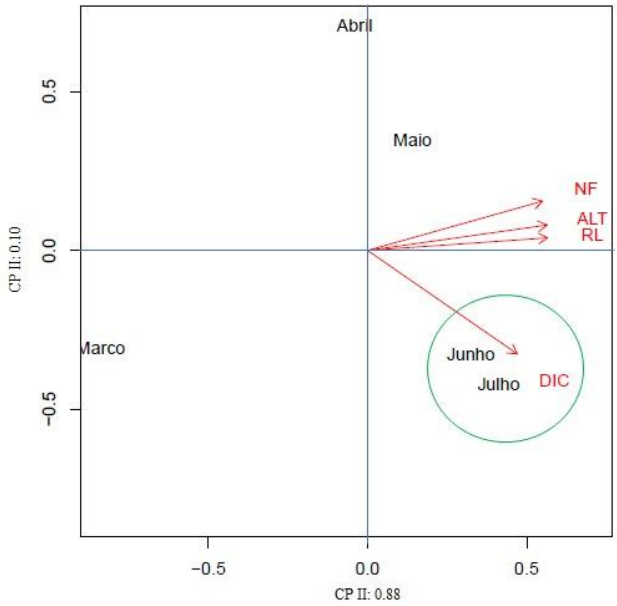

Figura 3. Análise de variáveis canônicas obtidas a partir do algoritmo de Mahalanobis, utilizando as variáveis morfológicas altura de plantas (ALT), diâmetro do caule (DIC), número de folhas (NF) e ramificações laterais (RL).

O sistema agroflorestal com implantação de café deve ter uma planta que permita o sombreamento para proporcionar conforto térmico e menor incidência de ventos; se a escolha for a bananeira, esta deve ser implantada com antecedência de um ano para que beneficie o cafeeiro no período seco e quente.